

при наличии вакансий и ионов O^{2-} . Кластерные расчеты CaF_2 проводили X_α -методом рассеянных волн и дискретного варьирования с различными способами учета кристаллического окружения, начиная от простого ведения заряженной сферы Ватсона или учета электростатического потенциала Маделунга для точечных ионов до наиболее адекватного подхода «внедренного» кластера с псевдопотенциальными граничными условиями. Поскольку энергетическое положение валентных $3d$ -состояний кальция существенно более чувствительно к учету правильного окружения, чем положение заполненных $2p$ -состояний фтора, для расчета был выбран кластер $[CaF_8]^{6-}$, учитывающий ближайшие к иону Ca^{2+} атомы фтора, расположенные в углах куба. В кластере $[Ca_4F_7]^+$ ни один из ионов Ca^{2+} не имеет правильного окружения из атомов фтора. Для расчета электронной структуры кластеров в решетке CaF_2 , в данной работе использовался X_α -метод дискретного варьирования. В базис численных атомных орбиталей включались $1s$ -, $2s$ -, $2p$ -состояния нейтрального атома фтора и $1s$ -, $3d$ -, $4s$ -, $4p$ -орбитали кальция. Исследование дефектов решетки CaF_2 на край поглощения проводилось на основании сравнительного анализа энергетической диаграммы свободного кластера в идеальном фториде кальция — $[CaF_8]^{6-}$, кластера с одной вакансией в окружении фтора $[CaF_7]^{5-}$ и системы с вакансией и одним замещенным ионом кислорода, расположенным на диагонали куба — $[CaF_6O]^{6-}$. Появление примеси кислорода, как следует из расчета кластера $[CaF_6O]^{6-}$, приводит к дальнейшему сдвигу края поглощения: переходы из валентной $2p$ -полосы на нижний вакантный уровень имеют энергию до 7,5 эВ. Теоретические расчеты подтверждаются данными спектров пропускания в ВУФ-области. Прокаленный в защитной атмосфере HF фторид кальция не имеет поглощения в области от 130 до 240 нм. Дефектный фторид кальция имеет четкий пик поглощения в области 160—155 нм.

УСОВЕРШЕНСТВОВАННАЯ ГАЗОФТОРИДНАЯ ТЕХНОЛОГИЯ ПОЛУЧЕНИЯ НИТРИДА АЛЮМИНИЯ

Елагин А.А., Григорьев В.В., Шишкин Р.А., Бекетов А.Р., Баранов М.В.

Уральский федеральный университет
620002, г. Екатеринбург, ул. Мира, д. 19

Нитрид алюминия является уникальным материалом по своим физико-химическим свойствам. AlN обладает высокой теплопроводностью — до 300 Вт/(м·К), высокими удельным электрическим сопротивлением (10^{13} Ом·см) и относительной диэлектрической проницаемостью (8,8), имеет высокий показатель твердости — 9 по шкале Мооса и низкое

значение температурного коэффициента линейного расширения ($4,6 \cdot 10^{-6} \text{ К}^{-1}$ при $20 - 500 \text{ }^{\circ}\text{C}$). Эти свойства позволяют предположить о перспективности его применения в электронной, электротехнической, металлургической, машиностроительной и атомной промышленности, как в виде спеченного материала на основе нитрида алюминия, так и при создании композиционных материалов.

Сдерживающим фактором широкого применения этого материала является низкая эффективность существующих промышленных способов получения нитрида алюминия, которые не могут обеспечить требуемую чистоту конечного продукта, а также не позволяют получать нитрид алюминия готовый к спеканию, исключая стадию введения спекающей добавки путем механического смешения. В процессе смешения в порошок неизбежно попадает нежелательная примесь кислорода, которая заметно ухудшает характеристики конечных изделий. В свою очередь методики, позволяющие получать высокочистый нитрид алюминия, являются очень энергоемкими и высокозатратными. В связи с этим, исследования, направленные на модернизацию и совершенствование технологий получения высокочистого нитрида алюминия являются на сегодняшний день актуальной задачей.

В течение 2-х последних лет на кафедре редких металлов и наноматериалов Физико-технологического института УрФУ имени первого Президента России Б.Н. Ельцина разработана усовершенствованная технология получения нитрида алюминия газотермическим способом, позволяющая получать дисперсный порошкообразный AlN в одну технологическую стадию. При этом определена возможность введения добавки фторида редкоземельного металла на стадии получения нитрида алюминия, что позволяет снизить содержание примеси кислорода в получаемом материале. При взаимодействии добавки с кислородом образуется оксид редкоземельного металла, повышающий спекаемость порошкообразного нитрида алюминия, а введение данной добавки именно на стадии получения нитрида алюминия способствует его равномерному распределению в порошкообразном AlN.

Использование распространенных и широкодоступных исходных материалов, возможность осуществления процесса при атмосферном давлении, а также применение графита марки ГМЗ в качестве конструкционного материала реакционной зоны установки для получения нитрида алюминия по усовершенствованной технологии позволяет снизить себестоимость получаемого материала. Это открывает широкие перспективы для внедрения данной технологии в промышленном масштабе и дальнейшего использования получаемого нитрида алюминия в различных отраслях науки и техники.